05

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ ПРИ ЧАСТИЧНОЙ РЕЛАКСАЦИИ НАПРЯЖЕНИЙ В ГЕТЕРОЭПИТАКСИАЛЬНОЙ СИСТЕМЕ

А. А. Жигалко

Рассмотрены теоретически условие инжекции дислокаций несоответствия и их распределение при частичной пластической релаксации напряжений в гетероэпитаксиальной системе с большими барьерами Пайерлса, когда источником дислокаций является край эпитаксиального слоя, а граница раздела их плоскостью скольжения. Пластическую релаксацию затрудняют три фактора: силы изображения, удерживающие дислокацию у края, низкая подвижность дислокаций в решетке с большими барьерами Пайерлса и стартовое напряжение (τ_0). Фронт пластической релаксации медленно с монотонно убывающей скоростью движется к серецине слоя и при $\tau_0 \neq 0$ останавливается на некотором удалении от края. На ряде примеров рассматривается возможность получения частично бездислокационной границы раздела при толщине слоя, многократно превышающей критическую.

Введение

В тех случаях, когда дислокации несоответствия (ДН) нежелательны, толщину w эпитаксиального слоя напряженной гетероэпитаксиальной системы (далее для краткости системы) приходится ограничивать некоторым значением w_c, ниже которого образование ДН энергетически невыгодно [1]. Для получения напряженных слоев с $w > w_c$ нужны технологии, при которых бы источники ДН не возникали, либо оказывались запертыми, либо работали достаточно медленно. В работе [2] рассматривалась возможность замедления пластической релаксации напряжений в полупроводниковой системе за счет снижения температуры выращивания слоя в случае, когда источниками ДН являются дислокации, проросшие из подложки в слой (модель Мэтьюза [1, 3, 4]). В настоящей работе с учетом достигнутого технологиями уровня [5] подобное рассмотрение проведено для изначально бездислокационной системы с атомно-гладкой границей раздела, совпадающей с плоскостью скольжения ДН. Единственным источником ДН в этом случае может служить край слоя, являющийся концентратором напряжений несоответствия.

1. Инжекция дислокаций несоответствия

Для выяснения возможности безактивационной инжекции ДН в границу раздела краем слоя найдем касательное напряжение, создаваемое слоем на бездислокационной границе раздела. Будем считать подложку и слой упруго-изотропными, подложку достаточно толстой. В этом случае мы имеем задачу о деформации упругой полуплоскости $S \equiv \{x_1 \geqslant 0\}$ (подложка) отрезком $L \equiv \equiv \{x_1 = 0;\ |x_2| < a\}$ (слой), наклеенным на $\Gamma \equiv \{x_1 = 0\}$ (поверхность подложки) в растянутом состоянии с постоянной вдоль L относительной деформацией ε_* (рис. 1). Напряжения σ_{ij} в S можно записать в виде [6]

$$\sigma_{11} = -\frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 e^{-i\xi x_2} Q d\xi, \quad \sigma_{22} = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\xi x_2} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} Q d\xi,$$

$$\sigma_{12}=\frac{i}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\xi e^{-i\xi x_2}\frac{\partial}{\partial x_1}Q d\xi, \qquad (1)$$

Q — образ фурье-функции Эйри $\Psi(x_1, x_2)$, причем

$$Q=Q(x_1, \xi)=\{A(\xi)+x_1 B(\xi)\}\exp(-|\xi| x_1), \qquad (2)$$

где $A(\xi)$ и $B(\xi)$ определяются условиями на Г.

Приложим к свободной границе Г в точке $x_2=x'$ в направлении $\mathbf{x}_2$ единичную касательную нагрузку $\tau^0(x_2)=\delta(x_2-x')$ и найдем с помощью (1) и (2) $\sigma_{22}(0, x_2)$, $\varepsilon_{22}(0, x_2)=\sigma_{22}(0, x_2)/E_S$ ($E_{S(L)}$ — модуль Юнга подложки (слоя)) и функцию Грина смещения точек $x_2=x$ на Г вдоль $\mathbf{x}_2$

$$u^0(x, x')=u^0(0, x')+\int\limits_0^x \varepsilon_{22}(0, x_2)\,dx_2=u^0(0, x')-\frac{2}{\pi E_S}V.\,p.\int\limits_0^x\frac{dx_2}{x_2-x'}, \qquad (3)$$

где $V.\ p.$ — главное значение интеграла в смысле Коши.

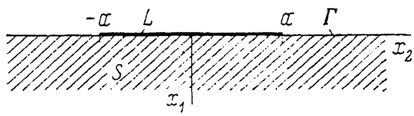


Рис. 1.

В состоянии равновесия после упругой релаксации напряжений в системе $L\cup S$ деформация отрезка L равна $\varepsilon_*+\varepsilon(x)$, где $\varepsilon(x)\equiv du/dx$, $u=u(x)$ — смещение точки $x_2=x$ на Г. Со стороны L на Г действует касательное напряжение

$$\tau(x)=wE_L\frac{d}{dx}\varepsilon(x), \quad |x|<a. \qquad (4)$$

С другой стороны, согласно (3),

$$\varepsilon(x)=\frac{2}{\pi E_S}V.\,p.\int\limits_{-a}^{a}\frac{\tau(x')}{x'-x}dx', \quad -\infty<x<\infty. \qquad (5)$$

Подставляя (4) в (5), получим

$$\varepsilon(\varkappa)=\frac{2}{\pi}\beta V.\,p.\int\limits_{-1}^{1}\frac{1}{(\zeta-\varkappa)}\frac{d}{d\zeta}\varepsilon(\zeta)\,d\zeta, \quad -\infty<\varkappa<\infty, \qquad (6)$$

где $\varkappa\equiv x/a$, $\zeta\equiv x'/a$, $\beta=kw/a$, $k=E_L/E_S$.

Уравнение (6) необходимо дополнить граничными условиями $\varepsilon(\varkappa=\pm 1)=-\varepsilon_*$ (боковые грани слоя свободны). Тогда оно будет иметь единственное решение, которое нетрудно получить методом Винера—Хопфа [7],

$$\varepsilon(\varkappa)=-\varepsilon_*\frac{2}{\pi}\left\{f\left(\frac{1-\varkappa}{2\beta}\right)+f\left(\frac{1+\varkappa}{2\beta}\right)\right\}, \quad -\infty<\varkappa<\infty, \qquad (7)$$

откуда с учетом (4)

$$\tau(x)=-\varepsilon_*\frac{E_S}{\pi}\left\{g\left(\frac{a-x}{2kw}\right)-g\left(\frac{a+x}{2kw}\right)\right\}, \quad |x|<a. \qquad (8)$$

Здесь $f(\xi)$ и $g(\xi)$ — известные [8] специальные функции

$$f(\xi)\equiv\int\limits_0^\infty\frac{\sin q}{q+\xi}dq, \quad g(\xi)=\int\limits_0^\infty\frac{\cos q}{q+\xi}dq. \qquad (9)$$

При инжекции левым (для определенности) краем слоя одной ДН в бездислокационную границу раздела на расстояние l от края энергия системы изменяется на величину

$$\delta W(l) = -\frac{b}{2}\int_0^l \{\tau(l') + \tau_\perp(l'-l)\}\,dl', \tag{10}$$

где $l' \equiv x+a$; $\tau_\perp(r)$ — касательное напряжение, создаваемое ДН на границе раздела ($r=0$ — координата ДН); b — модуль вектора Бюргерса ДН.

Для безактивационной инжекции необходимо, чтобы $\delta W(l) < 0$ для всех $l \leqslant w$ или с учетом (8) чтобы

$$\varepsilon_0 > \frac{1}{8(1+\nu)}\frac{b}{\zeta}\max_q \psi(q), \quad \psi(q) \equiv \frac{1}{q}\frac{\ln(1+q^2)}{(c-\ln q)}, \tag{11}$$

где $\varepsilon_0 = (b_L - b_S)/b_S$ — относительное несоответствие решеток, ν — коэффициент Пуассона, $\zeta = d/2(1-\nu)$, d — расстояние между соседними плоскостями скольжения, $c = 1-\gamma+\ln(2w/\zeta)$, $\gamma \approx 0.5772$ — постоянная Эйлера, $q \equiv l/\zeta$.

При выводе (11) принималось $E_L \approx E_S$, $\nu_L \approx \nu_S \approx \nu$, $d_L \approx d_S \approx d$ и учтено, что $g(\xi) \approx \xi^{-2}$ при $\xi \geqslant O(1)$, $g(\xi) \approx -(\ln\xi + \gamma)$ при $\xi \leqslant 1$, $\varepsilon_* = \varepsilon_0/(1-\nu)$ из-за двуосности несоответствия,

$$\tau_\perp(r) = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)}\frac{r}{(r^2+\zeta^2)}, \quad -\infty < r < \infty, \tag{12}$$

в дислокационной модели Пайерлса—Набарро [9] (G — модуль сдвига).

При $c \geqslant 4$ $\psi(q)$ имеет максимум при $q = q_m$, $2.0 \leqslant q_m \leqslant 5.4$,

$$q_m \approx 0.8\exp\left\{\frac{c}{2}\left(1-\left[1-\frac{4}{c}\right]^{1/2}\right)\right\}. \tag{13}$$

При $c \leqslant 4$ $\psi(q)$ монотонно возрастает и по смыслу условия (11) здесь следует брать $q_m \approx w/\zeta$.

Подчеркнем, что условие безактивационной инжекции (11) является необходимым. Невыполнение его означает, что при достаточно низких температурах ДН либо не образуется совсем, либо, образовавшись, удерживается у края силами изображения. Это обстоятельство полезно учитывать при технологических операциях с метастабильными напряженными слоями. В дальнейшем, однако, мы ограничимся рассмотрением технологически неблагоприятного случая, когда инжекция не лимитирует пластическую релаксацию системы.

2. Частичная пластическая релаксация при наличии стартового напряжения

Для релаксации напряжений в слое дислокации должны равномерно распределиться по границе раздела. Для этого им нужно пройти определенный путь от края к центру слоя. Из-за короткодействия напряжений (8) первая из ДН, однако, вскоре после инжекции практически остановится невдалеке от края. Дальнейшее ее продвижение к центру возможно лишь при помощи второй дислокации, которая в свою очередь «нуждается» в помощи третьей, и т. д. С увеличением порядкового номера инжектированной дислокации равномерно растет и мощность плоского скопления, которое ей «приходится» проталкивать к центру. Понятно, что на определенном шаге релаксационный процесс может быть прерван из-за запирания источника при наличии у дислокаций скопления некоторого стартового напряжения τ_0. Последнее наблюдалось в ряде случаев при исследовании подвижности индивидуальных дислокаций в полупроводниках и может быть объяснено, согласно [10], взаимодействием дислокации с точечными дефектами, например с остаточной или легирующей примесью. Это обстоятельство, как будет видно из дальнейшего, можно использовать для получения бездислокационной границы раздела.

Рассмотрим распределение ДН в скоплении с запертым источником. Для простоты будем считать дислокации чисто краевыми, а релаксацию одномерной.

Отдельная дислокация, достаточно удаленная от края, создает поле напряжений $\sigma_{ij}=\sigma^0_{ij}+\sigma^*_{ij}$, где σ^0_{ij} — напряжения краевой дислокации в континууме, σ^*_{ij} — напряжения, возникающие в системе от действия на поверхность слоя фиктивных нормальной p^* и касательной τ^* нагрузок (рис. 2)

$$p^* = -\sigma^0_{yy}(x,\ y)|_{y=w},\quad \tau^* = -\sigma^0_{xy}(x,\ y)|_{y=w}. \tag{14}$$

Применяя для нахождения σ^*_{ij} описанный в разделе 1 способ, в приближении одинаковых упругих констант слоя и подложки найдем $\sigma \equiv \sigma_{xy}\ (x,\ 0)$ и $\sigma_n \equiv \sigma_{xx}\ (0,\ y)$

$$\sigma(x) = 16\frac{A}{w}\frac{(\tilde{x}^4+\tilde{x}^2+4)}{\tilde{x}(\tilde{x}^2+4)^3},\quad \tilde{x}\equiv\frac{x}{w};\quad \sigma_n(y) = -8\frac{A}{w}\frac{(1-\tilde{y})}{\tilde{y}(2-\tilde{y})^3},\quad \tilde{y}\equiv\frac{y}{w}, \tag{15}$$

где $A=Gb/2\pi(1-\nu)$.

Отсюда найдем энергию ДН в ненапряженной системе

$$W_\perp = \frac{b}{2}\int\limits_{r_0}^{w}|\sigma_n|\,dy = \frac{bA}{2}\left\{-\ln\eta-\frac{1}{2}-\eta\frac{1-(5/2)\eta+\eta^2}{1-\eta}\right\}\approx\frac{bA}{2}\ln\left(\frac{2}{\sqrt{e}}\frac{w}{r_0}\right), \tag{16}$$

где $\eta=r_0/2w$, r_0 — радиус обрезания на ядре дислокации.

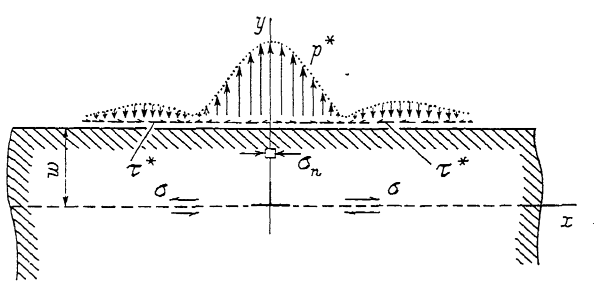


Рис. 2.

В состоянии метастабильного равновесия распределение ДН $\rho(x)$ описывается в континуальном приближении (условия применимости которого будут выяснены в дальнейшем) почти всюду на границе раздела уравнением

$$V.\,p.\int\limits_{-a}^{a}\sigma(x-x')\,\rho(x')\,dx' = -\tau_0\,\mathrm{sign}(x)\,I\,\{\rho(x)\neq 0\}, \tag{17}$$

где $I\,\{\ldots\}$ — индикатор условия $\{\ldots\}$.

Из (15) видно, что $\sigma(x-x')$ быстро убывает при $|x-x'|\geqslant 3w$. Это позволяет, если $\rho(x)$ изменяется не слишком резко, привести (17) к виду

$$\frac{d}{dx}\rho(x)\approx\alpha\,\mathrm{sign}(x)\,I\,\{\rho(x)\neq 0\},\quad \alpha=\frac{\tau_0}{4\pi Aw}, \tag{18}$$

разложив $\rho(x')$ по степеням $(x'-x)$. Уравнение (18) может иметь одно из двух линейных решений (рис. 3). Ширина области, не занятой скоплением $2l$, либо плотность скопления на середине границы раздела ρ_0 определяется условием запирания источника

$$\delta W_\Sigma + \delta\mathscr{A} = 0. \tag{19}$$

Здесь δW_Σ — изменение энергии всей системы (включая ДН) при изменении l на $\delta l<0$ либо ρ_0 на $\delta\rho_0>0$, δA — совершаемая при этом работа против трения $\tau_f=\tau_0$

$$\delta\mathscr{A} = \int\limits_{\Omega}\tau_0 b\,|u(x)|\,\rho(x)\,dx = \begin{cases}\tau_0 b\alpha(a-l)^2\,\delta l, & \rho_0=0,\\ \tau_0 ba^2\delta\rho_0, & \rho_0\neq 0,\end{cases} \tag{20}$$

где $\Omega \equiv \{l < |x| < a\}$ при $\rho_0 = 0$ и $\Omega \equiv \{|x| < a\}$ при $\rho_0 \neq 0$; $u(x)$ — смещение ДН с координатой x, отвечающее приращениям δl либо $\delta\rho_0$,

$$u(x) \equiv -\delta l, \ \rho_0 = 0; \ u(x) = -\frac{x}{\rho(x)}\delta\rho_0, \ \rho_0 \neq 0. \tag{21}$$

Далее имеем

$$W_\Sigma = W_L + W_S + \int_\Omega \left\{W_\perp(x) + W_{\perp L}(x) + \frac{1}{2}W_{\perp\perp}(x)\right\}\rho(x)\,dx. \tag{22}$$

Здесь W_L, W_S — энергия напряженных слоя и подложки соответственно (без учета ДН). $W_\perp$ определена в (16); $W_{\perp L}$, $W_{\perp\perp}$ — энергия взаимодействия напряжений дислокации и слоя, дислокации и скопления ДН соответственно.

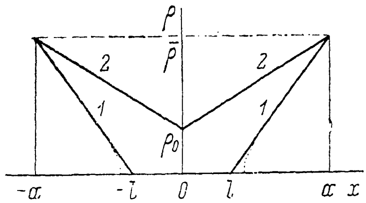


Рис. 3. Метастабильное распределение ДН при $\tau_0 \neq 0$.
1 — при большом τ_0 или небольшом w; *2* — при небольшом τ_0 или большом w; пунктир — строгое решение, отвечающее дискретному описанию головы скопления ДН.

Пренебрегая малой поправкой к W_Σ, связанной с неоднородностью напряженного состояния слоя на краях, и учитывая, что $\delta W_L = \delta W_S = 0$, получим из (19)

$$(W_\perp + W_{\perp L})\,\delta\int_\Omega \rho(x)\,dx + \frac{1}{2}\,\delta\int_\Omega W_{\perp\perp}(x)\,\rho(x)\,dx + \delta\mathscr{A} = 0, \tag{23}$$

где

$$W_{\perp L} = -E_L\varepsilon_* bw, \ W_{\perp\perp}(x)\,|_{x=x_n} \approx \sum_{n'\neq n}\ \int_{x_{n'}}^{\infty\cdot\mathrm{sign}\,(x_{n'}-x)} \sigma(x'-x_n)\,b\,dx', \tag{24}$$

x_n — координата n-й дислокации.

Выполнив суммирование в (24), получим с учетом (16), (20), (23), (24) условие запирания источника ДН в окончательном виде

$$-\Phi(w)\begin{Bmatrix}\partial/\partial l\\ \partial/\partial\rho_0\end{Bmatrix}\int_\Omega \rho\,dx + \frac{1}{2}\begin{Bmatrix}\partial/\partial l\\ \partial/\partial\rho_0\end{Bmatrix}\int_\Omega \varphi\rho\,dx = \begin{cases}(\tau_0/A)\,\alpha\,(a-l)^2 & \rho_0 = 0,\\ -(\tau_0/A)\,a^2, & \rho_0 \neq 0,\end{cases}$$

$$\Phi(w) \equiv 4\pi(1+\nu)\,\varepsilon_0 w/b - \frac{1}{2}\ln\left(\frac{2}{\sqrt{e}}\frac{w}{r_0}\right),$$

$$\varphi \equiv \lambda - \ln\lambda - (1+\lambda^2 e^\omega)/2, \ \lambda \equiv \omega/(e^\omega - 1), \ \omega = \omega(x) \equiv 4\pi w\rho(x). \tag{25}$$

При $\tau_0 = 0$ (25) является уравнением относительно термодинамически равновесной плотности $\bar\rho$ ДН. Можно выделить три области, в которых его решение имеет простой вид,

$$\bar\rho = \sqrt{\Phi(w)}/(2\pi w), \quad \bar\rho \ll 1/(2\pi w); \tag{26}$$

$$\bar\rho \approx \left\{\sqrt{\Phi(w) + 5/4} - 1\right\}/\pi w, \quad (4w)^{-1} \leqslant \bar\rho \leqslant (2w)^{-1}; \tag{27}$$

$$\bar\rho = (1+\nu)\,b^{-1}\varepsilon_0 - (8\pi w)^{-1}\ln\left(\frac{2}{\sqrt{e}}\frac{w}{r_0}\right), \quad \bar\rho \gg (2w)^{-1}. \tag{28}$$

Первое из них при $\bar\rho = 0$ ($w = w_c$) переходит в условие появления ДН

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{8\pi(1+\nu)}\frac{b}{w_c}\ln\left(\frac{2}{\sqrt{e}}\frac{w_c}{r_0}\right). \tag{29}$$

Из (26) и (29) видно, что $\bar\rho(w)$ круто растет в окрестности $w=w_c$. Это означает, что в технологиях, не позволяющих предотвратить предельную пластическую релаксацию, ограничение $w \leqslant w_c$ является весьма жестким.

Пусть теперь $\tau_0 \neq 0$. Из (15) и (29) следует, что для типичных $\varepsilon_0 \leqslant 10^{-2}$ континуальное приближение (17) при $w \geqslant O(w_c)$ будет несправедливо лишь вблизи головы скопления ДН, в области Ω', где $\rho(x)\, w \leqslant 1/3$. Здесь вместо (17) дискретный подход дает

$$\frac{d}{dx}\rho^2(x) = \theta\,\mathrm{sign}(x)\, I\{\rho(x) \neq 0\}, \quad \theta = \frac{\tau_0}{24QAw^2}, \quad Q \approx \sum_{j=1}^{\infty}\frac{1}{j^3} \approx 1.20. \qquad (30)$$

При $\rho_0 = 0$ (30) имеет решение (рис. 3, пунктир)

$$\rho(x) = [\rho^2(l) + \theta(|x| - l)]^{1/2}, \quad \rho(l) = (3\theta/2)^{1/3}, \quad x \in \Omega'. \qquad (31)$$

В дальнейшем ограничимся рассмотрением случая достаточно толстых слоев, когда $w\rho(x) \geqslant 1$ почти всюду в Ω и приближение (17) оправдано. Здесь $\omega \gg 1$, $\varphi \approx \omega$ и (25) в технически интересном случае ($\rho_0 = 0$) имеет решение

$$a - l = (A/\tau_0)\,\Phi(w). \qquad (32)$$

Отсюда, в частности, следует, что на краях слоя происходит предельная релаксация напряжений. В этом легко убедиться, сравнив $\rho(\pm a) = \alpha(a - l)$ с $\bar\rho$ в (28).

3. Частичная пластическая релаксация при нулевом стартовом напряжении

В относительно чистых полупроводниках (например, в InSb [11]) стартовое напряжение не наблюдается (в лабораторном диапазоне напряжений). Это означает, что оно мало́ ($\leqslant 0.5$ МПа) либо равно нулю. Поэтому рассмотрение релаксационного процесса с $\tau_0 = 0$ также представляет интерес.

Распределение ДН при $\tau_0 = 0$ описывается уравнением непрерывности

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = -\frac{\partial}{\partial x}(v\rho), \qquad (33)$$

где $v(x, t)$ — скорость ДН, зависящая от напряжения $\sigma_\perp$, действующего на нее со стороны скопления (раздел 2),

$$\sigma_\perp(x, t) = \int_{-a}^{a}\sigma(x - x')\,\rho(x', t)\,dx' \approx -4\pi A w\frac{\partial}{\partial x}\rho(x, t). \qquad (34)$$

Воспользуемся эмпирической зависимостью v от $\sigma_\perp$ [12]

$$v/v_0 = (\sigma_\perp/\sigma_0)^m, \qquad (35)$$

m, v_0, σ_0 — параметры, характеризующие подвижность индивидуальной дислокации на границе раздела при данной температуре.

Начальное условие для (33) $\rho(x, 0) = 0$, граничное определено в разделе 2: $\rho(\pm a) = \bar\rho$. В безразмерной форме релаксационная задача с учетом (35) и (34) имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial \tilde t}\tilde\rho = -\frac{\partial}{\partial \tilde x}\left[\left(-\frac{\partial}{\partial \tilde x}\tilde\rho\right)^m \tilde\rho\right], \qquad (36)$$

$$\tilde\rho(\tilde x, 0) = 0, \quad \tilde\rho(\pm\tilde a, \tilde t) = \bar{\tilde\rho}, \qquad (37)$$

где $\tilde\rho \equiv \rho/b^{-1}$, $\tilde x \equiv x/w$, $\tilde a = a/w$, $\tilde t \equiv t/t_1$, $t_1 = w/(nv_0)$, $n = \{2G/([1-\nu]\,\sigma_0)\}^m$.

Поскольку m может принимать различные значения ($0.7 \leqslant m \leqslant 1.5$ [10]), то аналитическое решение задачи (36), (37) представляется затруднительным. Это обстоятельство, однако, не исключает возможности аналитического определения из (36) мажоранты для такой технологически важной характеристики как глубина проникновения в границу раздела скопления ДН в зависимости от времени.

Действительно, (36) имеет (слева на границе раздела) частное решение

$$\tilde\rho(\tilde x, \tilde t) = \alpha(\tilde t) - \beta(\tilde t)\,\xi^{1+1/m}, \tag{38}$$

где $\xi \equiv \tilde x + \tilde a$, $\alpha(\tilde t) = \alpha_0 \tilde t^{-1/(2m+1)}$, $\beta(\tilde t) = \beta_0 \tilde t^{-1/m}$, $\beta_0 = m/[(m+1)(2m+1)^{1/m}]$, α_0 — произвольная пока константа.

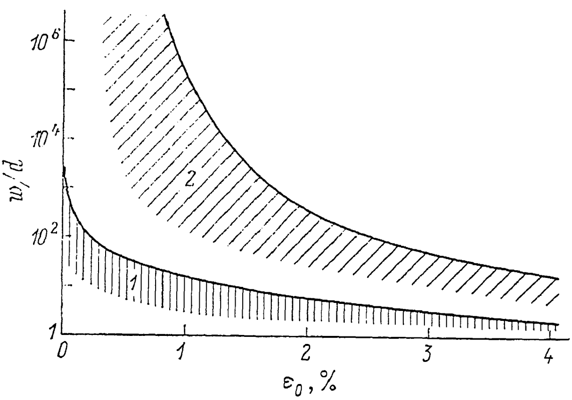
Движение фронта скопления $\xi = \tilde X$ описывается уравнением $\tilde\rho(\tilde a + \tilde X(\tilde t), \tilde t) = 0$, откуда

$$\tilde X(\tilde t) = \alpha_1 \tilde t^{1/(2m+1)}, \quad \alpha_1 = (\alpha_0/\beta_0)^{m/(m+1)}. \tag{39}$$

Для того чтобы $\tilde X w$ в некоторый произвольный момент $\tilde t = \tilde t_*$ было больше ширины реального скопления, следует выбрать α_0 так, чтобы $\alpha(\tilde t_*) = \tilde{\tilde\rho}$. Тогда (38) будет описывать распределение, создаваемое источником с $\tilde\rho(-\tilde a, \tilde t) = \alpha(\tilde t)$, более мощным при $0 < t < t_*$, чем реальный источник ДН. Таким образом, функция

$$\tilde{\tilde X}(\tilde t) \equiv w \tilde X(\tilde t) = w(\tilde{\tilde\rho}/\beta_0)^{m/(m+1)} \tilde t^{1/(m+1)} \tag{40}$$

при всех $\tilde t > 0$ больше ширины реального скопления (слева или справа на границе раздела).



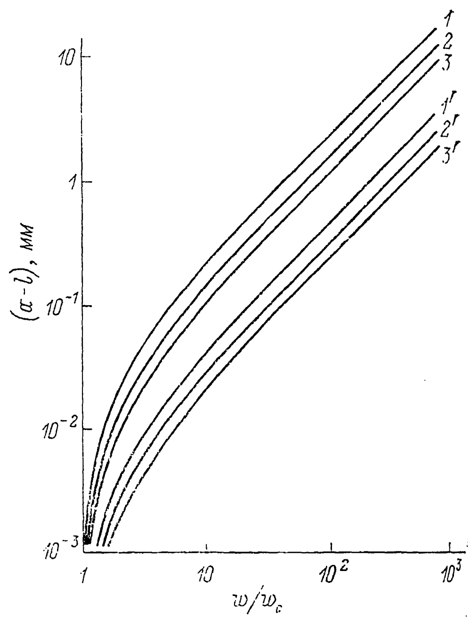


Рис. 4. Области стабильности (*1*) и метастабильности (*2*) бездислокационной напряженной гетероэпитаксиальной системы.

Рис. 5. Зависимость ширины метастабильного скопления ДН от относительной толщины слоя (например, $GaAs_{1-y}Sb_y$) на подложке GaAs.

τ_0, МПа: *1—3* — 0.5, *1'—3'* — 2.5; *1'* — ε_0=0.2 %, w_c=122.5d; *2'* — ε_0=1 %, w_c=16.6d; *3'* — ε_0=2 %, w_c=6.4d.

4. Количественные оценки

1. Для характерных в полупроводниках значений $\nu_0=0.3$, $r_0=b/4$ [9], $d=(\sqrt{3}/6)\,b$ (алмазоподобная решетка) найдем из (11) и (29) соответственно область метастабильности (где безактивационная инжекция ДН невозможна) и стабильности бездислокационных систем (рис. 4). Как видно из рисунка, в широком диапазоне значений ε_0 толщина метастабильного слоя может превышать w_c на порядок и более. Заметим, что из-за принятых в работе приближений ((8) и (12)) полученный результат следует рассматривать скорее как качественный.

2. Зависимость ширины метастабильного скопления ДН в частично релаксировавшей системе от относительной толщины слоя (32) при τ_0=0.5 и 2.5 МПа [1]

[1] Такие τ_0 наблюдались [13] соответственно в нелегированных монокристаллах GaAs n-типа ($n_{77\,K} \sim 10^{16}$ см$^{-3}$) и легированных Zn ($\sim 5 \cdot 10^{19}$ см$^{-3}$) при 200—500 °C. Диапазон 450—610 °C используется при молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) $Al_xGa_{1-x}As$ [5].

и различных ε_0 показана на рис. 5. В расчетах использовались следующие постоянные GaAs при $T=300$ К: $b=0.40$ нм, $G=4.9\cdot10^{10}$ Па, $\nu=0.23$ (усреднение Фогта). Как видно, наличие обычных стартовых напряжений позволяет получить бездислокационную границу раздела приемлемых размеров ($\sim$1 см) на подложке диаметром несколько сантиметров даже при $w\sim10^3\ w_c$. К сожалению, из-за отсутствия каких-либо данных о температурной зависимости τ_0 остается неясным, существуют ли температурные ограничения при использовании эффекта стартового напряжения.

3. Найдем зависимость от времени ширины скопления на примере системы $InSb_{0.9}As_{0.1}/InSb$,[2] где предположительно $\tau_0=0$. Здесь слой InSbAs натянут

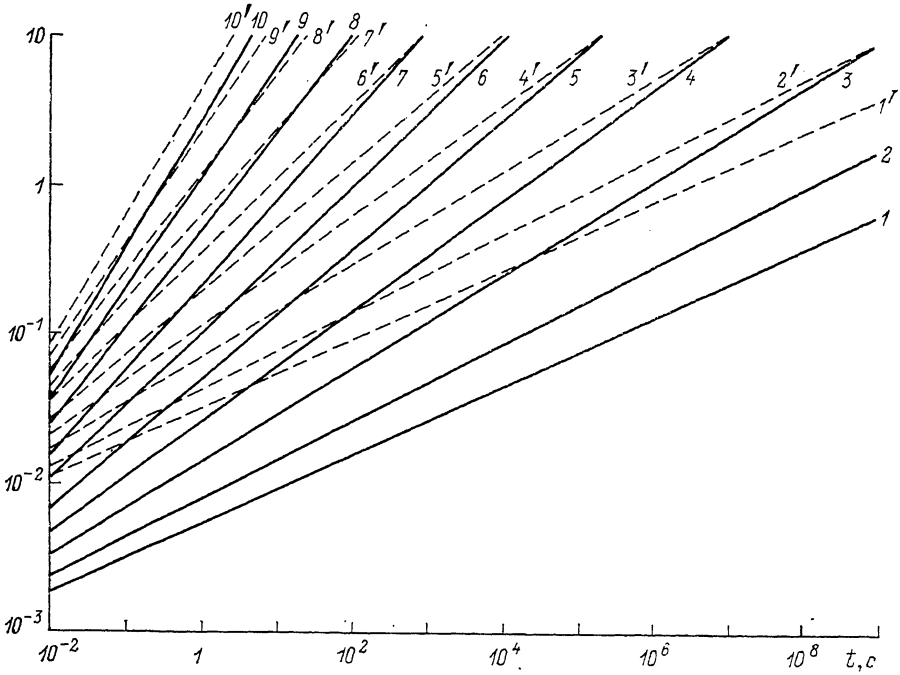


Рис. 6. Зависимость ширины скопления ДН от времени в системе $InSb_{0.9}As_{0.1}/InSb$.
w, мкм: *1—10* — 2, *1'*—*10'* — 20; *1'* — 20, *2'* — 50, *3'* — 100, *4'* — 150, *5'* — 200, *6'* — 250, *7'* — 300, *8'* — 350, *9'* — 400, *10'* — 450.

на подложку InSb, $\varepsilon_0\approx6.5\cdot10^{-3}$, $w_c\approx10$ нм. Зависимость от температуры параметра m в (40) определим по данным о подвижности α-дислокаций [3] в InSb [11]. В лабораторном диапазоне температур (348—498 К) она приближенно описывается формулой

$$m(T)\approx(T^{-1}-T_{\text{пл}}^{-1})\,m_0,\quad m_0\approx1.6\cdot10^3\ \text{К},\quad T_{\text{пл}}=803\ \text{К},\tag{41}$$

где $T_{\text{пл}}$ — температура плавления InSb.

Значения постоянных в InSb при $T=300$ К такие: $b=0.46$ нм, $G=2.5\times10^{10}$ Па, $\nu\approx0.28$. С помощью (28) и (40) найдем зависимость от времени ширины (оценка сверху) скопления для ряда значений T и w (рис. 6). Видно, в частности, что при стандартной технологии МЛЭ InSbAs (температура подложки 300—400 °С, скорость роста слоя $\sim$1 нм/с [16]) можно получать в середине системы бездислокационную границу раздела, пока $w\leqslant1$—2 мкм. В то же время, если каким-либо способом удалось бы создать напряженную систему с $w\sim$ O (10 мкм), при обычных температурных условиях хранения и эксплуатации такой структуры дрейф скопления к центру системы занял бы несколько десятков лет.

---

[2] Напряжения несоответствия используются здесь для сужения зоны запрещенных энергий в слое [14, 15].

[3] Именно α-, а не β-, поскольку слой растянут и наращивается в рассматриваемом случае в направлении [111] на Sb поверхности подложки.

Заключение

Проведенное рассмотрение показывает, что в полупроводниковых напряженных гетероэпитаксиальных системах можно достичь значительного превышения толщиной слоя своего критического значения, не выходя за рамки режимов, применяемых в существующих технологиях. При выращивании слоя этому способствуют два фактора: стартовое напряжение и (или) низкая подвижность дислокаций в полупроводниках. При изготовлении мезоструктуры дополнительным фактором, сдерживающим низкотемпературную пластическую релаксацию приповерхностной области слоя, будут силы изображения, удерживающие ДН вблизи вытравливаемых в слое канавок. Рассмотренная ориентация границы раздела (типа (111)), возможно, не самая благоприятная для целей создания метастабильных структур. В то же время из всех возможных ориентаций с малыми индексами только она теоретически исключает возможность образования (при инжекции ДН) у края слоя в плоскости границы раздела трещины, роста последней вдоль границы раздела и «отслаивания» слоя от подложки.

Автор благодарит В. В. Осипова и Л. Н. Неустроева за постановку задачи и многочисленные полезные обсуждения рассмотренных в работе вопросов, а также М. С. Никитина, заинтересовавшегося возможностью практического использования результатов работы.

Список литературы

[1] *Тхорик Ю. А., Хазан Л. С.* Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. Киев: Наукова думка, 1983. 304 с.
[2] *Tsao J. Y., Dodson B. W.* // Appl. Phys. Lett. 1988. Vol. 53. N 10. P. 848—850.
[3] *Matthews J. W., Mader S., Light T. B.* // J. Appl. Phys. 1970. Vol. 41. N 9. P. 3800—3804.
[4] *Matthews J. W.* // J. Vac. Sci. Technol. 1975. Vol. 12. N 1. P. 126—133.
[5] *Херман М.* Полупроводниковые сверхрешетки. М.: Мир, 1989. 240 с.
[6] *Амензаде Ю. А.* Теория упругости. М.: Высшая школа, 1976. 272 с.
[7] *Свешников А. Г., Тихонов А. Н.* Теория функций комплексной переменной. М.: Наука, 1979. 320 с.
[8] Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979. 832 с.
[9] *Хирт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
[10] *Никитенко В. И.* // Динамика дислокаций. Киев : Наукова думка, 1975. С. 7—26.
[11] *Осипьян Ю. А., Ерофеева С. А.* // ФТТ. 1969. Т. 11. Вып. 4. С. 944—950.
[12] *Мильвидский М. Г., Освенский В. Б.* Структурные дефекты в монокристаллах полупроводников. М.: Металлургия, 1984. 256 с.
[13] *Освенский В. Б., Холодный Л. П., Мильвидский М. Г.* // Динамика дислокаций. Киев: Наукова думка, 1975. С. 36—42.
[14] *Osbourn G. C.* // J. Vac. Sci. Technol. (B). 1984. Vol. 2. N 2. P. 176—178.
[15] *Kurtz S. R., Biefeld R. M., Dawson L. R.* et al. // Appl. Phys. Lett. 1988. Vol. 53. N 20. P. 1961—1962.
[16] *Lee G. S., Lo Y., Lin Y. F.* et al. // Appl. Phys. Lett. 1985. Vol. 47. N 11. P. 1219—1221.

Поступило в Редакцию
23 мая 1990 г.
В окончательной редакции
15 октября 1990 г.